УДК 001 (621.762)

А.Ю. КЕМ, Л.А. ЖАДЬКО

ПОРОШКОВАЯ МЕТАЛЛУРГИЯ И ПОСТНЕКЛАССИЧЕСКАЯ НАУКА

Показано, что порошковая металлургия проявляет свойства постнеклассического этапа развития науки, а порошковые объекты соответствуют принципам антропоморфности. Рассмотрено влияние парадигмальных прививок из других отраслей науки на междисциплинарность научных основ порошковой металлургии.
Ключевые слова: *порошковая, металлургия, постнеклассическая наука, междисциплинарность, смена парадигмы, электронная структура, антропоморфность.*

Введение. Вопрос о месте науки и техники в обществе, о взаимосвязях науки и техники с обществом является по-прежнему актуальным. Наука и техника изменяются очень быстро, поэтому прогресс общества обусловлен в том числе и развитием техники, разрешающим определенную часть общественных проблем. Техника как крупное самостоятельное общественное явление связана со всеми другими элементами системы «общество» и взаимодействует с ними, в том числе и с такой надстройкой, как философия.

В самом деле, создание техники выступает, с одной стороны, как акт духовного и материального творчества субъекта, методология которого связана через науку с философией, с другой стороны, созданная людьми техника, включенная в производственный процесс, является орудием господства над природой и в этом качестве воздействует на формирование мировоззрения как важный аргумент в пользу материализма. Более того, развитие техники непосредственно сказывается на развитии философии в качестве материального результата успехов познания [1].

Порошковая металлургия является одной из современных отраслей науки и техники, возникшей в результате междисциплинарных взаимодействий физики твердого тела, физической химии, механики материалов, других смежных наук.

Успехи порошковой металлургии неоспоримы [2] (см. также в списке литературы работы [2] следующие позиции: 3, 4, 22, 31, 38, 41), однако возникает вопрос о том, как эта отрасль технической науки связана с магистральным развитием современной физики, механики материалов, физической химии, поскольку в ней (порошковой металлургии) зачастую используются подходы, выработанные еще классической наукой.

Постановка задачи. Памятуя о принципе междисциплинарности и наличии парадигмальных прививок, можно предположить, что задачи и подходы, возникающие в порошковой металлургии, должны быть каким-то образом увязаны с проблемами неклассической и постнеклассической науки. Именно эту взаимосвязь мы попытаемся осветить в данной работе, имея в виду главным образом ее технический аспект.

Три этапа развития науки. Рассматривая этапы развития порошковой металлургии и ее научных основ, будем исходить из того, что, как и в любой фундаментальной естественной науке, здесь должны присутствовать элементы всех трех этапов ее развития: классического, неклассического и

постнеклассического [3]. Не претендуя на полноту, рассмотрим характерные черты указанных трех этапов развития науки.

Наука зародилась в Древней Греции, что было обусловлено наличием демократического духа, необходимого для научных дискуссий, и провозглашением истины как единственной ценности научных изысканий. Это связано с эпохальным изменением, произошедшим (согласно А. Тойнби) при переходе от традиционного общества к техногенной цивилизации – с возникновением новой системы ценностей. Наука изучает все в человеческом мире с особого ракурса, выходя в то же время за рамки предметных структур производства и обыденного опыта [1, 4].

Наука начинается с момента появления теоретического знания, которое наряду с эмпирическими правилами позволяет получать эмпирические зависимости из теоретических постулатов. Евклидова геометрия - первый образец научной теории, но в тот момент еще не проявилось теоретическое естествознание, поскольку древние греки не воспринимали эксперимент как путь познания природы. Лишь в эпоху Возрождения возникает мысль, что природе можно ставить теоретические вопросы и получать на них ответы путем эксперимента.

Галилей впервые обратил внимание на важность эксперимента, а Ф. Бэкон и Декарт заложили основы исследовательской программы, опирающейся на опытные данные. Ньютон и Лейбниц создали новую математику - дифференциальное и интегральное исчисления, без которых не могли бы быть сформулированы постулаты классической механики - законы Ньютона [5]. Затем усилиями Даламбера, Лагранжа, Гамильтона, Якоби была разработана аналитическая механика, принявшая наиболее строгий (с математической точки зрения) вид. Механика в XVIII, XIX вв. была доминирующей наукой. Так, Р. Бойль пытался применить принципы механики в химии [6], а «... идея мира как упорядоченной механической системы явно довлела над умами творцов американской конституции…»[1].

Чертами классической науки являются: четкое разделение между дисциплинами, между субъектом и объектом; подчеркнутая беспристрастность, провозглашаемая научной этикой; объективность, обусловленная правилами индукции; практическая направленность, опирающаяся на опыт.

Классической науке не удалось свести все взаимодействия к осевым воздействиям материальных точек друг на друга — исследования Фарадея и Максвелла привели к возникновению понятия поля, однако это не поколебало устои классической механики.

Неклассическая наука возникла в результате кризиса физики конца XIX - начала XX в. с появлением теории относительности и квантовой механики [7]. Квантово-механическое описание характеризуется тем, что в нем теоретические характеристики объекта определяются вследствие существенного взаимодействия между атомными объектами. В физике сформулированы принципы наблюдаемости, соответствия, инвариантности, обеспечивающие объективность теоретического знания о микрообъектах с квантованными свойствами, при этом "...измерения квантовых систем не являются повторимыми, но являются предсказуемыми".

В неклассической науке в большей степени проявляются междисциплинарные взаимодействия и парадигмальные прививки [8], причем"... для отыскания законов новой области явлений берут математические выраже-

ния близлежащей области, которые затем трансформируют". В соответствии с этим в квантовой теории сначала создавался формализм, описывающий свободные квантованные поля, а затем на этой основе строился аппарат, характеризующий взаимодействия полей. Физик-теоретик XX в. относится к существованию различных математических описаний одних и тех же объектов как к норме, осознавая, что наличие разных математических формулировок одной теории есть условие прогресса исследований [9,10].

Во второй половине XX в. наука все более приобретает постнеклассический характер, что связано со всеобщей компьютеризацией, возникновением сети Интернет и виртуалистики, появлением теорий самоорганизации, катастроф, синергетики [11]. Постнеклассический этап характеризуется тем, что "...наука перешла к изучению нового типа объектов – саморазвивающихся систем (в отличие от простых и саморегулирующихся систем, которые изучались на предшествующих этапах развития науки)". В рассмотрение вводятся такие свойства объектов, как системность, иерархичность, человекоразмерность [12]. Большие системы "...характеризуются уровневой организацией, наличием относительно автономных и вариабельных подсистем, массовым стохастическим взаимодействием их элементов, существованием управляющего уровня и обратных связей, обеспечивающих целостность системы", объект в данном случае рассматривается "...как процесс, воспроизводящий некоторые устойчивые состояния, и изменчивый в ряде других характеристик".

В науке особое значение приобретают комплексные программы исследований, реализация которых "...порождает особую ситуацию сращивания в единой системе деятельности теоретических и экспериментальных исследований, прикладных и фундаментальных знаний, интенсификации прямых и обратных связей между ними". Указанные программы можно рассматривать как некие "человеко-размерные" комплексы, примером реализации которых могут служить, в том числе и разработки новых порошковых материалов.

Указав на этапы развития науки, прежде всего физики, хотелось бы подчеркнуть, что постнеклассический характер современных теоретических построений вовсе не обусловливает полное исчезновение черт, присущих более ранним стадиям указанного процесса. В особой степени это должно касаться порошковой металлургии, поскольку она объединяет в себе сведения и методы из технических и естественных наук.

Рассматривая некоторые (далеко не полные) сведения из истории порошковой металлургии, прежде всего укажем, что историки техники выделяют две линии предыстории возникновения порошковой металлургии: получение порошковой платины и получение кричного железа.

Известно высказывание П.Г.Соболевского о первом опыте получения порошковой платины: «Продолжительность сего способа, требовавшего несколько дней на выжигание фунтового сплава платины … все сие неверное средство и стараться изыскать другое, более надежное» [13]. Соболевский изыскал принципиально иные пути создания нового способа получения платины. Текст доклада П.Г. Соболевского с подробным изложением полученного способа опубликован в "Горном журнале". Это первая публикация в истории техники, посвященная порошковой металлургии.

Автор отметил главные достоинства нового способа: 1) возможность обработки платины в кусках любой формы и величины, 2) проведение процесса в самое короткое время, 3) почти полное исключение потерь дорогостоящего металла и полная безопасность для окружающих, 4) простота и легкость самого процесса, 5) значительная экономия материалов, времени, рабочей силы.

Вторая линия связана с получением кричного железа. Археологические находки свидетельствуют о достаточно высоком уровне техники производства сыродутного железа. В качестве сырья, как правило, использовалась обогащенная железная руда. Операции обогащения сырой руды сводились к просушке, обжигу, размельчению, промывке и просеиванию. Восстановителем в домнице служил древесный уголь, заготовляемый ямным способом углежжения. Процесс восстановления железа в домнице протекал при большом избытке восстановителя: отношение массы угля к массе крицы достигало 8—10. В домнице процесс восстановления железной руды до железа сопровождался обильным образованием высокожелезистых шлаков со средним содержанием в них железа 40—50%, главной составляющей которых, как показывают анализы, является закись железа. Именно этой закисью железа должна была ошлаковываться пустая порода. Необходимым условием этого должно было быть поддержание температуры во всем рабочем пространстве домницы выше 1100° С. Это обеспечивалось применением достаточно равномерного и интенсивного дутья. Решающая роль дутья в производстве сыродутного железа была очевидна не только для мастеров, но и для людей, далеких от непосредственного участия в процессе производства железа. Приведем для иллюстрации выдержку из литературного памятника XII в. "Слово Даниила Заточника": "Не огнь творит ражежение железу, но надымание мешное..." [14].

Процесс организуется таким образом, чтобы ошлаковывание протекало ранее восстановления закиси железа до чистого железа, которое в виде твердых частиц опускается к низу печи и там сваривается в губчатую массу, называемую крицей.

Каковы же черты классической науки, которые обнаруживаются в теории порошковой металлургии? Рассматривая этот вопрос, обратим внимание на математическую интерпретацию процессов консолидации порошковой пористой системы, поскольку "...математические средства активно участвуют в самом создании абстрактных объектов теоретической схемы, определяют их признаки" [15].

Прежде всего, достаточно очевидно, что по-прежнему можно пользоваться уравнениями механики, основанными на законах Ньютона. Для того чтобы получить порошковый композиционный материал с заданным уровнем свойств, необходимо иметь математическую модель процесса совокупной консолидации, опирающуюся на уравнения математической физики.

Одним из существенных моментов, связывающих порошковую металлургию с классической наукой, является математическое моделирование основных физических процессов, связанных с образованием контактной поверхности между частицами. В рамках классической науки математическая модель процессов совокупной консолидации составляется для решения задачи синтеза порошкового материала.

Использование систем уравнений, описывающих те или иные процессы консолидации, очень эффективно с точки зрения компьютерных вычислений. Однако математическая основа здесь традиционна — тригонометрические преобразования известны со времен Евклида и Пифагора. Если же говорить о скоростях деформации, то потребуются элементы дифференциального исчисления, а этот аппарат существует с XVIII в. [16].

Таким образом, задачи порошковой металлургии, на первый взгляд, представляются вполне соответствующими классической науке. При этом подчеркнем еще раз роль междисциплинарности, которая обусловила постановку ряда новых задач и разработку алгоритмов их решения как для процесса прессования (механика деформируемого твердого тела, теория упругости и др.), так и для процесса спекания (физико-химия металлургических процессов, теория диффузионных процессов и др.). В рассматриваемой научной области стало трудно и даже невозможно разделить эти дисциплины, которые в совокупности обусловили новую науку – научную порошковую металлургию, представляющую собой нечто гораздо более сложное, чем просто формальная "сумма" составляющих ее дисциплин.

Таким образом, несмотря на то, что порошковая металлургия как объект изучения изначально подпадает под парадигму классической науки, очевидно, что в ней весьма много проявлений науки неклассической, по крайней мере, по двум причинам. Первая из них обусловлена междисциплинарностью порошковой металлургии - эта наука, будучи продуктом объединения классической теории механики материалов и физической химии металлургических процессов, теории диффузионных процессов, дала (в полном соответствии с принципами системности) результат гораздо более сложный и мощный, чем "сумма" составляющих элементов. Другая причина кроется в наличии парадигмальных прививок из других отраслей науки, в частности из физики XX в.

Но порошковая металлургия проявляет и свойства следующего этапа развития науки - постнеклассического. Известно, что свойствами изучаемых постнеклассической наукой объектов являются их системность, иерархичность, кооперативность взаимодействия подсистем, возможность бифуркаций.

Для уяснения наличия этих аспектов в порошковой металлургии рассмотрим этапы и уровни развития теории спекания порошковых пористых систем.

В порошковой металлургии можно отметить три этапа развития понимания природы явлений [17]:

1) установление корреляционных связей между различными свойствами вещества;

2) установление связей между свойствами, с одной стороны, и кристаллическим строением и дефектами вещества — с другой;

3) установление связей между свойствами и электронным строением вещества.

Нам представляется, что это же полностью относится к теории спекания, которая в основном прошла первый "классический" этап сопоставления параметров, "первоначального накопления" информации, связанный преимущественно с изучением феноменологии процесса (кинетики спекания); второй этап понимания – "неклассический", обусловленный хорошо развитыми аппаратами теории дислокаций и диффузионных процес-

сов, и сейчас развивается на третьем "постнеклассическом" этапе, связанном с успехами последнего десятилетия в изучении электронной структуры твердого тела.

Очевидно, что этот третий этап развития порошковой металлургии, в частности, теории спекания, должен дать наиболее общие и в то же время наиболее точные и конкретные возможности интерпретации, а следовательно,- прогнозирования, разработки материалов с заданными свойствами и процессов с оптимальными параметрами.

Классический подход к основной научной проблеме порошковой металлургии - проблеме создания контактной поверхности или совокупной консолидации - состоит в том, что для количественной оценки влияния основных элементарных процессов на ход уплотнения необходимо прежде всего количественно описать их как самостоятельные процессы, после чего попытаться установить (также количественно) их взаимосвязь и влияние на уплотнение.

Задача была бы полностью решена, если бы оказалось возможным описать эти процессы, основываясь на классических физических представлениях о несовершенствах решетки и их участии в течении кристаллического вещества. Однако, как будет показано ниже, те попытки, которые делались в этом направлении, не достигли цели: они в лучшем случае давали некоторое качественное объяснение, но не количественное описание.

Феноменологическая теория спекания. Основным классическим подходом к задаче выяснения природы элементарных процессов, определяющих ход уплотнения, является выявление феноменологической характеристики процессов и их описание с помощью общих положений кинетики химических реакций, которые, как известно, приложимы и к некоторым процессам, развивающимся в кристаллической решетке твердого вещества.

Феноменологический анализ кинетики спекания основан на контролировании процесса относительного уменьшения объема пор при нагреве образцов. Преимущество такого описания заключается в том, что указанное соотношение не зависит (или почти не зависит) от начальной плотности прессовок [18]. В. А. Ивенсен указывает, что изменение концентрации дефектов при спекании представляет собой «реакцию второго порядка». При этом изменение объема пор во время спекания характеризуется одновременным влиянием «геометрического» (изменения характерных геометрических параметров) и «субструктурного» (изменения дефектов концентрации) факторов. Такой анализ обходит вопрос об атомном механизме процессов и потому не является полным решением задачи, но он позволяет уяснить на уровне феноменологической теории сущность процессов.

Хотя феноменология спекания дает достаточно оснований считать, что именно влияние несовершенств кристаллов на скорость течения определяет вид временной зависимости уплотнения, имеется довольно много работ, в которых кинетика уплотнения рассматривается вне связи с изменением концентрации несовершенств, и падение скорости уплотнения во времени приписывается влиянию других факторов.

Современные представления о механизмах спекания. *Вязкое течение***.** В ряде работ, которые можно отнести ко второму этапу развития науки о спекании [17, 19-21], уменьшение скорости уплотнения во времени объясняется снижением капиллярных давлений ниже предела текучести

вследствие исчезновения участков поверхности с малым радиусом кривизны, что приводит к переходу от быстрой пластической деформации к медленному вязкому течению.

Критика этой точки зрения была дана И.М. Федорченко и Р.А. Андриевским [22], которые справедливо указывают, что эти представления противоречат факту высокой скорости уплотнения активных порошков с несовершенными кристаллами. Высокая концентрация несовершенств может лишь повысить предел текучести, а не снизить его. Кроме того, имеются сомнения в том, что капиллярные давления могут превысить предел текучести в объемах, охватывающих значительную часть спекаемого тела. Подсчеты, приведенные этими авторами, опровергают такую возможность. С. Герринг указывает, что хотя некоторые локальные значения капиллярного давления могут превысить предел текучести, вклад пластической деформации в общий процесс уплотнения не может быть значительным, так как в малых частицах образование новых дислокаций затруднено. К этому добавим, что превышение предела текучести возможно лишь у вершины контактных и прочих щелей с радиусом закругления порядка 10^{-5}—10^{-4} *см.* Такие щели быстро исчезают в начале спекания. Если пластическое течение вообще может оказывать влияние на ход уплотнения (что наиболее вероятно для мелких порошков с совершенной решеткой), то его влияние ограничивается периодом существования тонких щелей, исчезающих до начала изотермического спекания. Участие пластической деформации в изотермическом уплотнении мало вероятно.

Ряд авторов снижение скорости уплотнения связывает с одновременно развивающимся ростом зерна. Некоторые основания для этого дает теория диффузионного течения Герринга [17]. Вывод этой теории об обратной зависимости скорости диффузионного течения от квадрата среднего размера зерна в сочетании с кинетическими закономерностями роста зерна был использован Г.В. Самсоновым и М.С. Ковальченко [23, 24] для описания хода уплотнения при горячем прессовании.

В работе [17] использован примерно тот же подход для вывода кинетической закономерности уплотнения: учитывалась связь размера поры с размером зерна на основании геометрического построения и зависимость скорости зарастания поры от ее размера в соответствии с диффузионной теорией. Очевидно, что установленное автором некоторое снижение скорости сокращения объема пор во времени может быть вызвано повышением эффективной вязкости пористого тела вследствие уменьшения количества и размера пор. Однако этот эффект, как показано в [17, 18], недостаточен для объяснения наблюдаемого падения скорости уплотнения. В упомянутых работах показано, что для согласования расчета с экспериментом необходимо учитывать изменение вязкости во времени, обусловленное зависимостью вязкости от меняющейся субструктуры (или структуры) кристаллического вещества; это совпадает с данными, изложенными ранее в [21, 25].

Таким образом, без использования представлений о влиянии несовершенств кристаллов на скорость течения невозможно дать объяснение быстрому снижению скорости уплотнения в период наличия сообщающейся пористости. Вместе с тем учет влияния несовершенств при всей его феноменологической обоснованности также встречает значительные трудности.

Вакансионный механизм. Предложенный Б.Я. Пинесом в 1946 г. диффузионный механизм зарастания пор в дальнейшем был дополнен представлениями о том, что обусловливающее этот процесс диффузионное течение ускоряется пропорционально концентрации вакансий, которая в дефектных кристаллах намного превышает равновесную [17]. Обоснованность этих представлений, однако, далеко не бесспорна:

1) перемещение «пустот» в пределах пористого тела не может изменить его общий объем. При сквозной пористости спекаемое тело уплотняется равномерно по всему объему. Это подтверждает отсутствие преимущественного выхода вакансий на внешнюю поверхность, так как в этом случае наблюдалось бы ускоренное уплотнение участков, примыкающих к поверхности изделия. В теле с сообщающимися порами как внешняя поверхность, так и поверхность пор выполняет функции «стока вакансий». Вакансии, образовавшиеся на вогнутых участках, будут устремляться к ближайшему выпуклому участку поверхности в пределах данной или ближайшей поры. Такой процесс не будет вызывать изменения объема поры, а будет приводить, так же как и поверхностная миграция атомов, к сглаживанию поверхности и округлению пор.

Уточнение этого механизма, предложенное Я.Е. Гегузиным, — преимущественное перемещение вакансий по межблочным или межкристаллитным границам — также не дает объяснения уплотнению пористого тела с сообщающимися порами;

2) приложение диффузионного механизма к случаю повышенной против равновесной концентрации вакансий основывается на предположении, что скорость «растворения» пор пропорциональна градиенту концентрации вакансий и количеству перемещающихся вакансий. Отсюда делается вывод, что чем больше концентрация вакансий превышает равновесную, тем выше скорость зарастания пор. Однако Г.В.Самсонов [17] не заметил, что в исходные положения им введено условие, принятие которого делает невозможным образование вакансий у поверхности пор на основе диффузионного механизма. Напомним, что основным условием образования вакансий у поверхности поры является отток вакансий, снижающий концентрацию вакансий ниже равновесной. Если же концентрация вакансий будет выше равновесной для данного капиллярного давления, определяемого кривизной данного участка поверхности, то процесс пойдет в обратном направлении: вакансии будут «выходить» на поверхность и пора будет увеличиваться в объеме. Поэтому ожидать ускоряющего влияния избыточных вакансий на процесс зарастания пор нет никаких оснований;

3) представление о пропорциональности скорости течения концентрации избыточных вакансий не может быть согласовано со сверхвысокой скоростью течения дефектного кристалла при комнатной температуре. Варианты диффузионной теории, учитывающие связь перемещения вакансий со структурными элементами кристаллического тела, также не дают объяснения явлениям, наблюдаемым при спекании металлических порошков.

Механизм диффузионного течения Набарро-Герринга, связывающий диффузионную ползучесть вещества с перемещением вакансий в пределах участка совершенной решетки, ограниченного, согласно Ф. Набарро, малоугловыми границами блоков или, по С. Геррингу [17], обычными межкристаллитными границами, удовлетворительно описывающий диффузионное течение металла при высоких температурах и дающий в ряде слу-

чаев правильную количественную оценку скорости ползучести металла в отожженном состоянии [26], не оправдывается при описании тех же процессов в металлах с дефектной решеткой. Это вытекает уже из того обстоятельства, что источниками и стоками вакансий в металлах с дефектной решеткой служат не только границы, но и несовершенства внутри блоков или зерен. Созданная ими повышенная концентрация вакансий внутри блока может изменить знак градиента концентраций у границы, являющейся источником вакансий, что должно затормозить, а не ускорить транспорт вещества между границами блока или зерна.

Теория Набарро-Герринга в рамках неклассических представлений не может объяснить огромные различия в скоростях деформации кристаллических частиц, так же как и резко различные скорости уплотнения при спекании реальных металлических порошков, приготовленных различными способами. Попытки использования других вариантов диффузионного механизма, в том числе и формального применения теории Я.И. Френкеля к случаю неравновесной концентрации вакансий [27], явно не достигают цели.

Дислокационная модель спекания. По формальным признакам ход уплотнения активных порошков близок к внешней характеристике неустановившейся ползучести, описываемой «теорией истощения». В вариантах этой теории Н. Мотт и Ф. Набарро, А.Х. Коттрелл, С. Смит рассматривают течение вещества как итог многочисленных элементарных актов скольжения, каковыми являются перемещения отдельных участков дислокаций. Приращение энергии, необходимое для сдвигового скачка, осуществляется за счет тепловых флуктуаций. Предполагается, что скачок дает некоторое постоянное приращение деформации, причем каждый элемент делает скачок только один раз.

Согласно этим теориям, скорость ползучести пропорциональна количеству элементов скольжения и уменьшается во времени по экспоненциальному закону. Однако оценка изменения текучести во времени при спекании металлических порошков, выполненная В.А. Ивенсеном, не подтверждает это положение. Оказывается, что при большой концентрации несовершенств (в деформированных или быстро выросших кристаллах) густая сетка пересекающихся дислокаций препятствует течению вещества.

Более того, из совокупности всех наблюдений может быть сделано заключение, что ход уплотнения при низкотемпературном спекании, по-видимому, определяется особым механизмом, физическая сущность которого в рамках представлений как "классической", так и "неклассической" физики не установлена.

Электронная теория спекания. Наиболее общие представления теории спекания должны быть разработаны на субатомном, электронном уровне, поскольку фундаментальной основой любых представлений о переносе массы и энергии является электронное строение. Однако этому препятствовало отсутствие однозначных представлений об электронной структуре вещества в конденсированном состоянии, а также трудность перехода от представлений на корреляционном и атомном уровнях к уровню электронному. Это очевидно, поскольку "…мы имеем в виду прежде всего психологическое воздействие, смену научных представлений. …Дело в том, что эти вопросы принадлежат к «вечным» вопросам науки, которые в каждой научной эпохе переосмысливаются по-новому и для которых смена

точки зрения имеет не меньшее значение, чем разработка новой конкретной задачи” [28].

Отсутствие единой теории электронной структуры вещества вызвало необходимость создания ряда моделей электронного строения, которые являются временными заменителями общей теории и с той или иной степенью приближения описывают отдельные вопросы электронного строения. Как известно, применение двух «предельных» моделей - Гайтлера - Лондона - Гейзенберга (ГЛГ) и Блоха — к переходным металлам не принесло значительных успехов в объяснении их свойств. Оказалось, что одни свойства переходных металлов можно понять только с позиций теории коллективизированных электронов, а другие - только с позиции модели локализованных состояний.

Нельзя, по-видимому, признать полностью успешными и попытки описания свойств переходных металлов в рамках s-d-моделей, основанных на предположении о существовании в переходных металлах двух подсистем электронов - локализованных и коллективизированных (первыми обусловлена связь между атомами в кристалле и магнитные свойства d-металлов, а вторыми - кинетические и другие свойства, связанные с существованием поверхности Ферми).

Первая из таких моделей была предложена Вонсовским и развивалась в дальнейших работах его школы. Сюда же относятся и модели, сформулированные Бадером, Волланом, Моттом и Стивенсом, Гудинафом, в которых причиной деления электронов на две подсистемы считались эффекты кристаллического поля, расщепляющего зону на подзоны t_g- и t_{2g} -симметрии. По поводу этих моделей еще Герринг [17] указывал, что «…едва ли анизотропия кристаллического поля может быть столь большой, чтобы произвести четкое разделение электронных состояний». Такое же мнение высказывал Брукс в обзоре [29]. Проведенные расчеты действительно показали, что эффекты кристаллического поля тонут в структуре энергетической d-зоны.

Таким образом, следует признать, что определенный успех в объяснении свойств кристаллов связан с тем, что предположение о существовании двух подсистем электронов является достаточно удачной формой учета сложной двойственной природы d-электронов.

Принятие представления о подразделении валентных электронов на локализованные и коллективизированные, с участием локализованных электронов в ковалентной связи, характерной для модели ГЛГ, приводят к так называемой конфигурационной модели [30], которая удобна для инженерного использования, в частности для интерпретации механизма процесса спекания.

Сущность указанной модели заключается в том, что валентные электроны изолированных атомов при объединении последних в конденсированное состояние разделяются на локализованные статистически у остовов атомов и коллективизированные (нелокализованные). Локализованная часть валентных электронов образует спектр конфигураций, в котором наибольшим статистическим весом обладают наиболее устойчивые конфигурации, им же отвечает минимальный запас свободной энергии. Такими конфигурациями для s-элементов является s^2, для переходных металлов - d^0, d^5, d^{10}, f^0, f^7, f^{14}, для sp-элементов - s^2p^6, а также квазиустойчивая конфигурация sp^3 [31].

В общем случае наибольшая локализация обусловливает макси-

мальную прочность и наивысшую симметрию кристаллической решетки, а также наибольшую долю ковалентных, направленных связей.

Для создания постнеклассической теории спекания использованы представления диффузионной теории, крипа и рекристаллизации на субатомном, электронном уровне [17].

Диффузия. В работах [17-19] рассмотрен механизм самодиффузии на основе представлений конфигурационной модели. Показана зависимость энергии активации при самодиффузии для некоторых переходных металлов от степени локализации валентных электронов в d^5-конфигурации. Энергия активации закономерно возрастает с увеличением степени локализации, а также с ростом главного квантового числа валентных электронов, т.е. с повышением энергетической устойчивости d^5-конфигураций.

Если рассматривать с тех же позиций явление гетеродиффузии, то следует считать, что обязательным условием прохождения процесса гетеродиффузии является формирование системы, более устойчивой (т. е. обладающей меньшим запасом энергии), чем исходная. На субатомном уровне это означает локализацию электронов с образованием дополнительного числа атомов, обладающих энергетически устойчивыми (стабильными) конфигурациями. Для начала электронного обмена между атомами, участвующими в диффузионном процессе, необходимо их возбуждение, характеризующееся энергией E_B, которая уменьшается с понижением степени локализации в исходной системе. Энергия активации E_A, очевидно, должна быть пропорциональна разности энергии локализации и энергии возбуждения.

Многочисленные примеры интерпретации параметров диффузии в различных системах с позиций конфигурационной модели показывают, что электронные представления достаточно полно и однозначно описывают процесс и параметры диффузии, независимо от того, к какому классу электронных аналогов относятся партнеры систем.

*Рекристаллизация***.** Движущей силой рекристаллизации является накопленная в процессе деформации остаточная энергия. Следовательно, температура начала рекристаллизации при прочих равных условиях в заданном состоянии вещества должна быть связана с энергией межатомного взаимодействия, которая, в свою очередь, является функцией электронного строения вещества. Энергия активации для переходных металов с d^5-конфигурациями закономерно повышаются с ростом степени локализации и энергетической устойчивости локализованных состояний. Аналогичная картина наблюдается для тугоплавких соединений, например для карбидов [17].

*Дефекты структуры***.** В работах [17, 32] показано, что дислокационные нарушения в твердых телах связаны с их электронным строением в том смысле, что вероятность появления дислокаций увеличивается с уменьшением степени локализации валентных электронов в стабильные конфигурации и с понижением энергетической устойчивости таких локализаций.

Качественно образование дислокационных нарушений в кристаллической решетке можно интерпретировать следующим образом. Ато-

мы с различной энергетической устойчивостью не могут располагаться совершенно произвольно в объеме формирующейся кристаллической решетки. В каком-то микрообъеме собираются атомы в одинаковом энергетическом состоянии, причем сначала в высшем — d^5, «выталкивая» из него атомы в других, низших, состояниях. Так образуются своеобразные границы раздела, а затем и грани кристалла, имеющие различную плотность упаковки, различную энергетическую плотность, что вызывает явление анизотропии всех свойств.

В этом случае на границах микрообъемов должны возникнуть скопления краевых дислокаций. Моделью механизма рассматриваемого явления является образование дислокаций при эпитаксиальном росте пленок в случае несоответствия между подложкой и растущей пленкой, предположенное Франком и Ван де Мерве и доказанное экспериментально [33, 34]. Снижение степени локализации в пограничном слое микрообъема не обязательно должно строго распределяться по атомным плоскостям. Возможно, например, флуктуационное различие степени локализации на разных краях одной и той же плоскости. Вероятно также, что микрообъемы с повышенной степенью локализации служат основой субзеренных образований.

Состояние поверхности. На поверхности любого кристаллического образования степень локализации меньше, чем в объеме, что вызывает повышенную активность поверхности. Это проявляется в адсорбционной способности поверхностей [17, 29], в поверхностной диффузии и повышенной подвижности поверхностных атомов, стремящихся переместиться в направлении, где они могли бы достичь более полной локализации. Такими местами являются места контакта между частицами, так как вблизи них наиболее вероятен переход поверхностных атомов с пониженной локализацией в состояние объемных атомов с более высокой локализацией и, следовательно, с меньшим запасом свободной энергии. Возникновение вблизи контактных участков повышенной локализации, постепенное заполнение узких пространств между частицами затрудняют дальнейший обмен электронами между спекаемыми частицами, поэтому всегда наиболее активна первая стадия спекания, после чего процесс спекания затрудняется.

Из этого вытекает необходимость мероприятий, которые могут привести к активированию процесса спекания. Это, во-первых, спекание тонких порошков, размер частиц которых соизмерим с величиной зоны повышенной локализации, возникающей у контактов, во-вторых - введение в спекаемый порошок присадок, обеспечивающих понижение свободной энергии спекаемой системы за счет усиления локализации. Примером может служить активированное спекание вольфрама [17], где активаторами являются никель, палладий и другие сильные акцепторы электронов, захватывающие нелокализованные электроны вольфрама. Очевидно, что для такой активации всегда должна быть изыскана четко выраженная система донор - акцептор.

Диффузионно-вязкое течение - это направленное перемещение вакансий от областей, находящихся под давлением, обусловленное диффузионным перемещением вещества, в свою очередь, определяющимся разной степенью локализации. Обработка при температурах, выше которых

наступает такое течение [17], показывает, что эти температуры определяются степенью и энергетическими характеристиками локализации валентных электронов атомов вещества. Так, для металлов, у которых электроны локализованы преимущественно в d^5-конфигурации, отношение $T_к / T_{пл}$ ($T_к$ — температура, выше которой наступает неограниченная текучесть) равно 72-74% (Pt, Ni, Ag, Cu); для металлов с более высоким весом d^5-конфигураций (Cr, Fe) оно составляет 56-57%, а для многих sp-элементов приближается к 100%. Отсюда следует, что текучесть возрастает с уменьшением степени общей локализации валентных электронов в стабильные конфигурации, достигая минимума у sp-элементов, где локализация максимальна и сопровождается образованием жестких, направленных связей.

Заключение. Экскурс, предпринятый в историю развития порошковой металлургии позволяет сделать вывод, что в рассматриваемой системе должна присутствовать модель (математическое представление о структуре порошкового материала и параметрах его консолидации), должны быть "осознание" поставленной задачи и контроль за ее исполнением. Это свидетельствует об антропоморфности рассматриваемой порошковой пористой системы.

Установлено, что порошковая металлургия - это иерархически построенная система, поскольку все перечисленные этапы ее развития присутствуют в любом современном процессе консолидации (на более высоком уровне), будь то процессы холодного, статического или горячего прессования.

Показано, что дисциплина "Научные основы порошковой металлургии" изначально явилась продуктом объединения физики твердого тела, теории механики деформируемого твердого тела (включая теорию упругости), теории диффузионных процессов (включая теорию ползучести), теории металлургических физико-химических процессов и новой науки (нового раздела физики) - теории электронного состояния вещества. Все эти дисциплины можно считать подпадающими под эгиду классической науки, однако в результате объединения возникло нечто большее, чем их формальная "сумма", и каждой из этих дисциплин пришлось решать необходимые для этого объединения задачи.

Возникшая в результате междисциплинарного взаимодействия новая дисциплина – научные основы порошковой металлургии - стала во многом носить черты неклассической науки, причиной чему явились парадигмальные прививки из физики. Речь идет, в частности, об дислокационно-вакансионных представлениях о строении вещества. В настоящее время эта научная дисциплина все более приобретает характер постнеклассической науки. Данный тезис обусловлен тем, что порошковое пористое тело, обладающее признаками функциональности и градиентности как технический объект, соответствует принципам антропоморфности. Очевидно, что это проявляется как в структуре самого порошкового объекта (функционально-градиентного материала) – основного продукта порошковой металлургии, так и в построении систем управления технологическими процессами порошковой металлургии, в которые может быть "встроен" человек-оператор. Необходимость создания порошковых функционально-градиент-

ных материалов, материалов с особыми, наперед заданными свойствами, приводит к появлению новых иерархически организованных систем, например, связанных с гибким автоматизированным производством порошковых изделий [35].

Таким образом, научные основы порошковой металлургии несут в себе тесно переплетенные проявления всех трех этапов развития науки: классического, неклассического и постнеклассического.

Библиографический список

1. *Негодаев И.А.* Наука и техника как социальные явления./ И.А. Негодаев. – Ростов н/Д:Изд-во РГУ, 1973. – 212 с.
2. *Кем А.Ю.* Специальные методы порошковой металлургии для изделий электронной техники: моногр. /А.Ю.Кем. – Ростов н/Д: Издательский центр ДГТУ, 2007.- 153 с.
3. *Кузнецов В.И.* От истории к теории развития науки. Вслед за лидером. // Вопросы философии. – 2004. - №1. – С.17-25.
4. *Воронин А.А.* Техника и мораль. / А.А.Воронин // Вопросы философии. – 2004. - №10. - С.93-101.
5. *Стройк Д.Я.* Краткий очерк истории математики. / Д.Я. Стройк. - М., 1990. - С.203.
6. *Кузнецов В.И.* Химия и химическая технология. Эволюция взаимосвязей. / В.И. Кузнецов, З.А. Зайцева. - М.: Наука, 1984. - 154 с.
7. *Менский М.Б.* Квантовые измерения и декогеренция. Модели и феноменология. / М.Б. Менский. - М., 2001. - 212 с.
8. *Перминов В.Я.* Философия и основания математики./ В.Я. Перминов.- М., 2001.
9. *Менский М.Б.* Квантовая механика, сознание и мост между двумя культурами. // Вопросы философии. – 2004. - №6. – С..64-74.
10. *Глазунов В.А.* Робототехника и постнеклассическая наука. / В.А.Глазунов // Вопросы философии. – 2003. - №11. – С.27-35.
11. *Пепроуз Р.* Новый ум короля: о компьютерах, мышлении и законах физики./ Р. Пепроуз.- М., 2003. - 138 с.
12. *Степин В.С.* Генезис социально-гуманитарных наук (философский и методологический аспекты). / В.С.Степин // Вопросы философии. – 2004. - №3. – С.37-43.
13. Порошковая металлургия в СССР: История. Современное состояние. Перспективы. - М.: Наука, 1986. - 58 с.
14. Слово Даниила Заточника /Под ред. Н.Н. Зарубина. - Л., 1932. - Т.3. - 25 с.
15. *Степин В.С.* Теоретическое знание. / В.С. Степин. - М., 2000. – С.117.
16. *Султанова Л.Б.* Роль неявных предпосылок в историческом обосновании математического знания. / Л.Б.Султанова // Вопросы философии. – 2004 - №4 - С.102-105.
17. Теория и технология спекания. / Под ред. Г.В.Самсонова. - Киев: Наукова Думка, 1974. - 236 с.
18. *Ивенсен В.А.* Кинетика уплотнения металлических порошков

при спекании. / В.А. Ивенсен. - М.: Металлургия, 1971. - 272 с.

19. *Вейсс Р.* Физика твердого тела. / Р. Вейсс. – М.: Мир, 1968.

20. *Вонсовский С.В.* Физика магнитных материалов / С.В.Вонсовский // Изв. АН СССР. Серия физич., 1957. Т.21. – С.854-869.

21. *Меерсон Г.А.* Современное состояние теории основных процессов порошковой металлургии / Г.А.Меерсон // Вопросы порошковой металлургии. Изд-во АН УССР. - Киев, 1955. – С.16.

22. *Федорченко И.М.* Влияние пластической деформации на спекание пористых тел из серебра / И.М. Федорченко, Р.А. Андриевский // Порошковая металлургия. – 1961. - №1. – С.9.

23. *Самсонов Г.В.* Особенности кинетики уплотнения порошков ковалентных веществ / Г.В. Самсонов, С.М. Ковальченко // Порошковая металлургия. -1961. - №1. – С.20.

24. *Ковальченко М.С.* Деформация и течение пористого тела / М.С. Ковальченко, Г.В. Самсонов // Порошковая металлургия. - 1961. - №2. – С.3.

25. *Скороход В.В.* Исследование кинетики уплотнения при спекании / В.В.Скороход // Порошковая металлургия. – 1961. - №2. – С.14.

26. *Мак-Лин Д.В.* Границы зерен в металлах / Д.В. Мак-Лин // Вакансии и точечные дефекты. Пер. с англ. Под ред. В.М. Розенберга . –М.: Металлургиздат, 1961. – С.197.

27. *Ивенсен В.А.* Феноменология спекания и некоторые вопросы теории. / В.А. Ивенсен. 1985. - 248 с.

28. *Зельдович Я.Б.* Фрактали, подобие, промежуточная асимптотика. / Я.Б.Зульдович, Д.Д.Соколов // УФН, изд. РАН, М .146 (7), (1985). - С.121-130.

29. *Партенский М.Б.* Самосогласованная электронная теория металлической поверхности // УФН, изд. РАН, М., 128 (5), 1979. – С.612-645.

30. *Самсонов Г.В.* Конфигурационная модель вещества. / Г.В. Самсонов, И.Ф. Прядко, Л.Ф. Прядко. – Киев: Наукова думка, 1971. - 213 с.

31. *Бете Г.* Квантовая механика. / Г. Бете. – М.: Мир, 1995. - 239 с.

32. *Самсонов Г.В.* О связи между дислокационными нарушениями и электронным строением твердого тела / Г.В.Самсонов, Ю.С.Ваулин// Порошковая металлургия. – 1970. - №3. - С.67.

33. *Амелинкс С.* Методы прямого наблюдения дислокаций. / С. Амелинкс. – М.: Мир, 1998. - 312 с.

34. *Графутин В.И. , Прокопьев Е.П.* Применение позитронной аннигиляционной спектроскопии для изучения строения вещества. // УФН, изд. РАН, М., 172 (1), 2002.- С.34-53.

35. *Кем А.Ю.* Получение порошковых функциональных градиентных материалов методом вакуумно-термического магнитно-импульсного прессования / А.Ю.Кем, Е.Л.Стрижаков // ФиХОМ, изд. РАН, М. – 2006, №3. – С.53-56.

Материал поступил в редакцию 28.11.08.

A.JU. KEM, L.A.ZHADKO

POWDER METALLURGY AND POSTNONCLASSICAL SCIENCE
THE ABSTRACT

Modern representations about interrelation of problems and the approaches arising in powder metallurgy, with problems of a nonclassical and postnonclassical science are stated.
It is shown, that in the powder metallurgy initially falling under a paradigm of a classical science, it is a lot of displays of a science nonclassical, that is connected as to set of scientific disciplines in its scientific bases, and With presence of conceptual models (a paradigm inoculations) from other branches of a science.
It is established, that powder metallurgy shows properties of a postnonclassical stage of development of the science caused with successes in studying of electronic structure of a firm body. It is shown, that the powder porous body possessing attributes of functionality and distinction in properties (a gradient of structure and properties) as the technical object corresponds to principles antropomorfizm.

КЕМ Александр Юрьевич (р.1949), профессор кафедры «Технология конструкционных материалов» ДГТУ (2005), доктор технических наук (2004).
Область научных интересов – процессы порошковой металлургии.
Публикации: 2 монографии, 3 брошюры, 2 учебных пособия, 125 научных статей и сообщений, 40 авторских свидетельств СССР и патентов РФ на изобретения.
alekem@yandex.ru

ЖАДЬКО Людмила Александровна, аспирантка кафедры ТКМ ДГТУ.
Область научных интересов – процессы порошковой металлургии и экология.
Публикации: 8 научных статей и сообщений, 1 патент РФ на изобретение.